

# Corso di Approssimazioni Numeriche, A.A. 2007/08

ESERCITAZIONE DI LABORATORIO SU:

## Calcolo di integrali su domini bi-dimensionali

Prof. S. De Marchi - 28 febbraio 2008

### 1 Generalità sulla cubatura

Sia  $D \subset \mathbb{R}^n$ ,  $n \geq 2$ . Sia  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$  un generico punto di  $D$ . Una formula di cubatura è un'espressione

$$I(f) = \int_D f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \approx \sum_{j=0}^l w_j f(\mathbf{x}_j) := \tilde{I}(f) \quad (1)$$

dove i punti  $\mathbf{x}_j$  sono in  $\bar{D}$ . Per ragioni di stabilità chiederemo che  $w_j \geq 0$ .

**Definizione 1.** Una formula di cubatura si dirà di ordine o grado di precisione  $k$  se essa è esatta per tutti i polinomi  $p \in \mathbb{P}_k^n$  (ovvero polinomi di grado  $\leq k$  in  $\mathbb{R}^n$ ).

Circa l'errore di cubatura, se  $f \in C^{k+1}(\bar{D})$  e la formula è di ordine  $k$ , vale la stima

$$\|I(f) - \tilde{I}(f)\| \leq c \|f\|_{k+1, \infty, D} \quad (2)$$

dove  $\|\cdot\|_{k+1, \infty, D}$  indica la seminorma delle derivate parziali di ordine  $k+1$  in norma  $\infty$  e  $c$  indica una costante indipendente da  $f$

**Teorema 1.** Sia  $D$  convesso e limitato in  $\mathbb{R}^n$ . Allora il numero minimo  $m$  di nodi  $\mathbf{x}_j$  affinché (1) abbia ordine  $k$  è

$$\binom{n + \lfloor \frac{k}{2} \rfloor}{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor} \leq m \leq \binom{m+k}{k}.$$

Inoltre, il solo metodo di ordine 1 ad un solo nodo è

$$\int_D f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \approx \text{mis}(D) f(\mu),$$

dove  $\mu$  indica il baricentro di  $D$ .

### 2 Formule su un n-simplesso $T_n$

Ci soffermeremo sulle cosiddette **formule simmetriche**

**Definizione 2.** Una formula di cubatura su  $T_n$  è **simmetrica** se è invariante per permutazioni delle coordinate baricentriche dei nodi  $\mathbf{x}_j$ .

**Definizione 3.** Indicando con  $\lambda_i$  le  $n+1$  coordinate (dipendenti) baricentriche su  $T_n$ , nel caso del triangolo ovvero  $T_2$ , i metodi simmetrici sono caratterizzati dalle seguenti proprietà

- Un metodo è simmetrico di ordine 1 se è esatto per  $f(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = \lambda_1$  (ovvero coincide con un polinomio di primo grado).
- Un metodo è simmetrico di ordine 2 se è esatto per  $f(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = \lambda_1, \lambda_1^2, \lambda_1\lambda_2$  (non servono  $\lambda_2$  e  $\lambda_3$  perchè si usa la simmetria).
- Un metodo è simmetrico di ordine 3 se è esatto per  $f(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = \lambda_1, \lambda_1^2, \lambda_1^2\lambda_2, \lambda_1\lambda_2\lambda_3$ .

## 2.1 Metodi simmetrici ottimali sul triangolo

Sia  $T_2$  il triangolo di vertici  $A, B, C$

T1. Si tratta di una formula di ordine 1 ad un nodo.

$$\int_{T_2} f(\mathbf{x})d\mathbf{x} \approx \text{mis}(T_2)f(\mathbf{a})$$

dove  $\mathbf{a} = \left(\frac{1}{n+1}, \dots, \frac{1}{n+1}\right)$ . Facciamo osservare che questo metodo funziona anche su  $T_n$ , per questo lo abbiamo definito nel caso generale, ovvero con  $n \geq 2$ .

T2. Si tratta di una formula di ordine 2 a 3 nodi.

$$\int_{T_2} f(\mathbf{x})d\mathbf{x} \approx \text{mis}(T_2) \cdot \frac{1}{3} \{f(\mathbf{a}_{A,B}) + f(\mathbf{a}_{A,C}) + f(\mathbf{a}_{B,C})\}$$

dove  $\mathbf{a}_{A,B}$ ,  $\mathbf{a}_{A,C}$  e  $\mathbf{a}_{B,C}$  indicano i punti medi dei del corrispondenti lati. Alternativamente lo stesso ordine di esattezza lo si ottiene con la formula seguente.

T3. Si tratta di una formula di ordine 2 a 3 nodi.

$$\int_{T_2} f(\mathbf{x})d\mathbf{x} \approx \text{mis}(T_2) \cdot \frac{1}{3} \{f(\mathbf{x}_1) + f(\mathbf{x}_2) + f(\mathbf{x}_3)\}$$

dove  $\mathbf{x}_1 = \left(\frac{2}{3}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}\right)$   $\mathbf{x}_2 = \left(\frac{1}{6}, \frac{2}{3}, \frac{1}{6}\right)$  e  $\mathbf{x}_3 = \left(\frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{2}{3}\right)$ .

T4. Si tratta di una formula di ordine 3 a 4 nodi.

$$\int_{T_2} f(\mathbf{x})d\mathbf{x} \approx \text{mis}(T_2) \left[ \frac{25}{48} \{f(\mathbf{x}_1) + f(\mathbf{x}_2) + f(\mathbf{x}_3)\} - \frac{9}{16}f(\mathbf{a}) \right]$$

dove  $\mathbf{x}_1 = \left(\frac{3}{5}, \frac{1}{5}, \frac{1}{5}\right)$   $\mathbf{x}_2 = \left(\frac{1}{5}, \frac{3}{5}, \frac{1}{5}\right)$  e  $\mathbf{x}_3 = \left(\frac{1}{5}, \frac{1}{5}, \frac{3}{5}\right)$  e  $\mathbf{a}$  indica il baricentro.

## 2.2 Metodi simmetrici ottimali sul tetraedro

Presentiamo solo 2 formule ottimali.

S1. Si tratta di una formula di ordine 2.

$$\int_{T_3} f(\mathbf{x})d\mathbf{x} \approx \frac{\text{mis}(T_3)}{4} \cdot \sum_{j=1}^4 f(\mathbf{x}_j)$$

dove  $\mathbf{x}_j = \left(\frac{5-\sqrt{5}}{20}, \frac{5-\sqrt{5}}{20}, \frac{5-\sqrt{5}}{20}, \frac{5+3\sqrt{5}}{20}\right)$  e i suoi tre permutati. Una formula analoga, in termini di precisione, è la seguente:

$$\int_{T_3} f(\mathbf{x})d\mathbf{x} \approx \text{mis}(T_3) \left[ \frac{1}{10} \cdot \sum_{j \neq i}^4 f(\mathbf{a}_{i,j}) + \frac{2}{5} f(\mathbf{a}) \right]$$

dove  $\mathbf{a}_{i,j}$  sono i punti medi dei lati del tetraedro e  $\mathbf{a}$  indica il baricentro.

S2. Si tratta di una formula di ordine 3.

$$\int_{T_3} f(\mathbf{x})d\mathbf{x} \approx \frac{\text{mis}(T_3)}{20} \cdot \left[ 9 \sum_{j=1}^4 f(\mathbf{x}_j) - 16f(\mathbf{a}) \right]$$

dove  $\mathbf{x}_j = \left(\frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{2}\right)$  e come al solito  $\mathbf{a}$  indica il baricentro.

### 3 Formule su ipercubi

Sia  $C_n = [-1, 1]^n$  un ipercubo in  $\mathbb{R}^n$ . Essendo la struttura di un ipercubo abbastanza semplice, un procedimento elementare consiste nel costruire dei metodi simmetrici come **prodotto-tensoriale** di  $n$  metodi elementari in dimensione 1 sul segmento  $[-1, 1]$ .

Usando la tecnica del prodotto-tensoriale si ottengono metodi esatti sullo spazio  $p(\mathbf{x}) \in \mathbb{Q}_k^n$  ovvero dei polinomi di grado  $\leq k$  sull'ipercubo  $C_n$

$$p(\mathbf{x}) = \sum_{0 \leq i_j \leq k, 1 \leq j \leq n} \alpha_{i_1 \dots i_n} x_1^{i_1} \dots x_n^{i_n} .$$

**Nota:**  $\dim(\mathbb{Q}_k^n) := (k+1)^n$  e  $\mathbb{P}_k^n \subset \mathbb{Q}_k \subset \mathbb{P}_{n,k}$  .

Come fatto nella precedente sezione, iniziamo con il quadrato, per poi passare al cubo.

#### 3.1 Metodi sul quadrato

Indichiamo con  $C_2 = [-1, 1]^2$  il quadrato di vertici  $\mathbf{a}_i$ ,  $1, \dots, 4$ .

Q1. Questa è la *formula dei trapezi*. Si tratta di una formula di ordine 1 a 4 nodi.

$$\int_{C_2} f(\mathbf{x})d\mathbf{x} \approx \sum_{i=1}^4 f(\mathbf{a}_i)$$

Q2. Questa è la *formula di Simpson*. Si tratta di una formula di ordine 3 (esatta su  $\mathbb{Q}_3$ ) a 9 nodi.

$$\int_{C_2} f(\mathbf{x})d\mathbf{x} \approx \frac{1}{9} \left[ \sum_{i=1}^4 f(\mathbf{a}_i) + 4 \sum_{i=1}^4 f(\mathbf{a}_{i,j}) + 16 f(\mathbf{0}) \right]$$

dove  $\mathbf{a}_{i,j} = \frac{1}{2}(\mathbf{a}_i + \mathbf{a}_j)$  sono i punti medi dei 4 lati, mentre  $\mathbf{0}$  indica il baricentro del quadrato.

Q3. Questa è una *formula di Gauss-Legendre*. Si tratta di una formula di ordine 3 (esatta su  $\mathbb{Q}_3$ ) a 4 nodi, quindi **ottimale**

$$\int_{C_2} f(\mathbf{x})d\mathbf{x} \approx \left[ \sum_{i=1}^4 f(\mathbf{x}_i) \right]$$

dove  $\mathbf{x}_i = \left( \pm \frac{1}{\sqrt{3}}, \pm \frac{1}{\sqrt{3}} \right)$  sono i punti ottenuti prendendo il prodotto tensoriale degli zeri dei polinomi di Legendre di grado 2 in  $[-1, 1]$ .

### 3.2 Metodi sul cubo

Indichiamo con  $C_3$  il cubo.

C1. Si tratta di una formula non simmetrica a 4 nodi, di ordine 2 e ottimale.

$$\int_{C_3} f(\mathbf{x})d\mathbf{x} \approx 2 \sum_{i=1}^4 f(\mathbf{x}_i)$$

dove  $\mathbf{x}_1 = \left( \frac{2}{\sqrt{6}}, 0, \frac{1}{\sqrt{3}} \right)$   $\mathbf{x}_2 = \left( 0, \frac{2}{\sqrt{6}}, -\frac{1}{\sqrt{3}} \right)$   $\mathbf{x}_3 = \left( -\frac{2}{\sqrt{6}}, 0, \frac{1}{\sqrt{3}} \right)$  e  $\mathbf{x}_4 = \left( 0, -\frac{2}{\sqrt{6}}, -\frac{1}{\sqrt{3}} \right)$

C2. Si tratta di una formula simmetrica a 15 nodi, di ordine 5.

$$\int_{C_3} f(\mathbf{x})d\mathbf{x} \approx \frac{1}{9} \left[ \sum_{i=1}^8 f(\mathbf{a}_i) + 20 \sum_{i=1}^6 f(\mathbf{x}_i) - 56 f(\mathbf{0}) \right]$$

dove al solito,  $\mathbf{a}_i$ ,  $i = 1, \dots, 8$  sono i vertici, mentre  $\mathbf{x}_1 = \left( \sqrt{\frac{2}{5}}, 0, 0 \right)$  e gli altri si ottengono permutando e cambiando il segno.

## 4 Esercitazione proposta

Si consideri la funzione  $f(x, y) = y \sin(x) + x \cos(y)$  su  $D = \{(x, y) : \pi \leq x \leq 2\pi, 0 \leq y \leq \pi\}$ .

1. Calcolare l'errore assoluto di cubatura usando le formule  $Q_1$ ,  $Q_2$ ,  $Q_3$ . Come valore esatto dell'integrale, usare il valore restituito usando la funzione `dblquad`.

2. Per avere un'approssimazione più accurata, calcolare l'integrale usando  $N = n^2$ ,  $n > 3$  punti di Chebyshev-Lobatto.

Per rispondere al secondo quesito, facciamo prima alcune osservazioni analitiche, partendo dal caso uni-dimensionale

$$\int_{-1}^1 f(x)dx = \int_a^b f(y(x))dy \quad (3)$$

dove la trasformazione lineare  $y(x) = (b+a)/2 + x(b-a)/2$  consente di passare dall'integrale tra  $[-1, 1]$  all'integrale in  $[a, b]$ . Da cui  $dy = (b-a)/2 dx$  ovvero  $2/(b-a)dy = dx$ . Inoltre, la funzione da integrare nel membro di sinistra in (3) non è  $f(x)$  ma  $\sqrt{1-x^2}f(x)$ , essendo associata all'integrale nella misura di Chebyshev. Pertanto per passare alla funzione peso corretta in  $[a, b]$ , dovremo applicare la trasformazione

$$\sqrt{\left(1 - \frac{2y - (b+a)}{b-a}\right) \left(1 + \frac{2y - (b+a)}{b-a}\right)} \quad (4)$$

che trasforma la funzione peso  $\sqrt{1-x^2}$  da  $[-1, 1]$  ad  $[a, b]$ .

Se indichiamo con  $\sum_{i=0}^n w_i f(x_i)$  la formula di quadratura in  $[-1, 1]$ , la formula corrispondente  $\sum_{i=0}^n \hat{w}_i f(\hat{x}_i)$  in  $[a, b]$ , avrà i nodi  $\hat{x}_i$  e i pesi  $\hat{w}_i$

$$\begin{aligned} \hat{x}_i &= (b+a)/2 + (b-a)/2 x_i \\ \hat{w}_i &= (b-a)/2 w_i \end{aligned}$$

Vediamo come procedere dal punto di vista implementativo. Facciamo uso delle funzioni Matlab/Octave `r_jacobi.m` e `lobatto.m` del toolbox di quadratura di W. Gautschi (visto alla prima esercitazione), che ci consentono di determinare i nodi e i pesi di cubatura in  $[-1, 1]$ , dando le due istruzioni

```
ab=r_jacobi(n,-0.5);
xw=lobatto(n-2,ab,-1,1)
```

L'array `xw` ha dimensione  $n \times 2$ : nella prima colonna avremo i nodi in  $[-1,1]$  (ovvero *i punti di Chebyshev-Lobatto*), nella seconda i relativi pesi di Chebyshev-Lobatto. Per ottenere i nodi di cubatura nel dominio  $D = [ax, bx] \times [ay, by]$  basterà dare l'istruzione

```
[X,Y]=meshgrid((bx-ax)/2*xw(:,1)+(ax+bx)/2,(by-ay)/2*xw(:,1)+(ay+by)/2);
```

Per determinare i pesi corretti, relativi al dominio  $D$ , faremo uso delle trasformazioni

```
Wx=diag(xw(:,2)*(bx-ax)/2);
Wy=diag(xw(:,2)*(by-ay)/2);
```

che ci consentono di determinare due matrici diagonali le cui diagonali sono proprio i pesi nelle direzioni  $x$  e  $y$ . Per avere l'approssimazione dell'integrale cercata "basterà" calcolare il seguente prodotto scalare  $Wx * F(X, Y, ax, bx, ay, by) * Wy$  dove  $F()$  indica la matrice della funzione valutata nei nodi. Infatti, la formula di cubatura-prodotto si scrive, nel nostro caso, come

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n w_{i,x} w_{j,y} f(x_i, y_j) .$$

La funzione  $F()$  deve pesare la funzione originale con il peso trasformato (cfr. equazione (4))

$$\sqrt{(1-y(x))(1+y(x))} \sqrt{(1-z(y))(1+z(y))} .$$

Una possibile implementazione della funzione  $F()$  è come segue:

```
function z=F(x,y,ax,bx,ay,by)
A=(2*x-(bx+ax))/(bx-ax);
B=(2*y-(by+ay))/(by-ay);

peso=sqrt((1-A).*(1+A).*(1-B).*(1+B));

z=(y.*sin(x)+x.*cos(y)).*peso;
end
```

Tempo assegnato: 2 ore.

## 5 Approfondimenti

### 5.1 Cubatura su domini generali

Forse il più completo package di cubatura in due dimensioni è il CUBPACK++ di Ronald Cools dell' Università di Leuven (Belgio) <http://www.cs.kuleuven.be/~ronald/> a cui si rimanda per approfondimenti teorici e implementativi.

### 5.2 Il metodo Monte-Carlo e il calcolo di integrali

Il Metodo Monte Carlo fa parte della famiglia dei metodi statistici non parametrici. È utile per superare i problemi computazionali legati ai test esatti (ad esempio i metodi basati sulla distribuzione binomiale e calcolo combinatorio, che per grandi campioni generano un numero di permutazioni eccessivo).

Il metodo è usato per trarre stime attraverso simulazioni. Si basa su un algoritmo che genera una serie di numeri tra loro incorrelati, che seguono la distribuzione di probabilità che si suppone abbia il fenomeno da indagare. L'incorrelazione tra i numeri è assicurata da un test  $\chi$  quadrato.

La simulazione Monte Carlo calcola una serie di realizzazioni possibili del fenomeno in esame, con il peso proprio della probabilità di tale evenienza, cercando di esplorare in modo denso tutto

lo spazio dei parametri del fenomeno. Una volta calcolato questo campione rappresentativo, la simulazione esegue delle 'misure' delle grandezze di interesse su tale campione. La simulazione Monte Carlo è ben eseguita se il valore medio di queste misure sulle realizzazioni del sistema converge al valore vero.

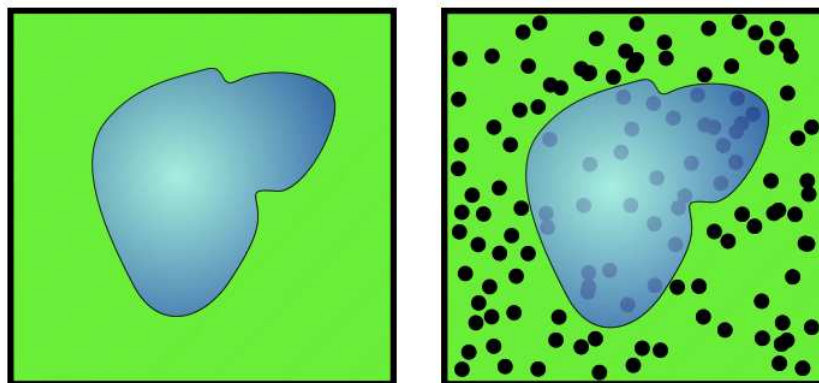
Da un altro punto di vista le simulazioni Monte Carlo non sono altro che una tecnica numerica per calcolare integrali.

ESEMPIO 1. Questo è un esempio classico della divulgazione del metodo Monte-Carlo. Sia data una zona rettangolare o quadrata di cui la lunghezza dei lati è conosciuta. Al centro di quest'area si trova un lago la cui superficie è sconosciuta. Grazie alle misure dei lati della zona, si conosce l'area del rettangolo. Per determinare l'area del lago, si chiede ad una truppa armata di tirare  $X$  colpi di cannone in modo aleatorio su questa zona. Contiamo in seguito il numero  $N$  di palle che sono restate sulla terra, possiamo quindi determinare il numero di palle che sono cadute dentro il lago:  $X - N$ . È sufficiente quindi stabilire un rapporto tra i valori:

$$\frac{S_T}{S_L} = \frac{X}{X - N}$$

$$S_L = \frac{(X - N) \cdot S_T}{X}$$

Per esempio, se il terreno ha superficie di  $S_T = 1000m^2$ , e supponiamo che l'armata tiri 500 palle e che 100 proiettili sono caduti dentro il lago allora la superficie del lago è:  $S_L = 100 * 1000 / 500 = 200 m^2$ . Stima della superficie del lago grazie a dei tiri di cannone casuali



Naturalmente, la qualità della stima migliora aumentando il numero dei tiri ed assicurandosi che l'artiglieria non miri sempre lo stesso posto ma copra bene la zona. Questa ultima ipotesi coincide con l'ipotesi di avere un buon generatore di numeri aleatori, questa condizione è indispensabile per avere dei buoni risultati con il metodo Monte Carlo. Un generatore distorto è come un cannone che tira sempre nello stesso punto: le informazioni che genera sono ridotte.